

## АЛГОРИТМИ ДЛЯ ЧИСЕЛЬНОГО РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧІ ДИФУЗІЇ РЕЧОВИНИ В НАНОПОРОВОМУ СЕРЕДОВИЩІ

**Вступ.** Математичне моделювання масопереносу в неоднорідних середовищах мікропористої структури та побудова розв'язків відповідних задач масопереносу розглядалися різними авторами [1–9 та ін]. В роботах [6, 7] запропоновано методологію моделювання систем масопереносу та ідентифікації параметрів в середовищах частинок нанопористої структури (дифузія, адсорбція, компетитивна дифузія газів, фільтраційна консолідація), які описуються неklasичними крайовими задачами з урахуванням взаємовпливів потоків мікро- і макропереносу, різнопористості, структури мікропористих частинок, багатоконпонентності та інших чинників. У роботах [8, 9] для математичної моделі неусталеної дифузії моноречовини в нанопоровому середовищі, яка описана в [2] у вигляді різномасштабної диференціальної математичної задачі, отримано класичні задачі в слабкій постановці. У даній роботі для вищевказаної математичної задачі побудовано алгоритм розв'язання з використанням методу скінченних елементів. Наведено результати чисельного розв'язання тестової задачі, які підтверджують ефективність розроблених алгоритмів.

**Математична модель.** Нехай [2] концентрація  $c(x, t)$ , (кількість молекул/см<sup>3</sup>) речовини, яка дифундує через пористу пластину товщини  $l$  (см), що складається з великої кількості сферичних пористих складових радіусу  $R$  (см) (рисунок) ( $0 < R \ll l < \infty$ ), описується параболічним рівнянням

$$\varepsilon \frac{\partial c}{\partial t} = d_1 \varepsilon \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - 3(1 - \varepsilon) \frac{d_2}{R} \left( \frac{\partial q}{\partial r} \right) \Big|_{r=R}, \quad (1)$$

де  $r \in [0, R]$ ,  $(x, t) \in \Omega_T$ ,  $\Omega_T = (0, L) \times (0, T)$ ,  $\varepsilon$  – пористість;  $d_1, d_2$  – коефіцієнти дифузії відповідно по макро- та мікропорах, см<sup>2</sup>/с;  $q$  (кількість молекул/см<sup>3</sup>) – концентрація речовини, яка дифундує по малих складових.

*Розглянуто питання чисельного розв'язання за допомогою методу скінченних елементів диференціальної різномасштабної математичної задачі масопереносу речовини в нанопористому середовищі.*

**Ключові слова:** математичне моделювання, чисельні методи, неусталена дифузія моноречовини, нанопорове середовище, метод скінченних елементів (МСЕ).

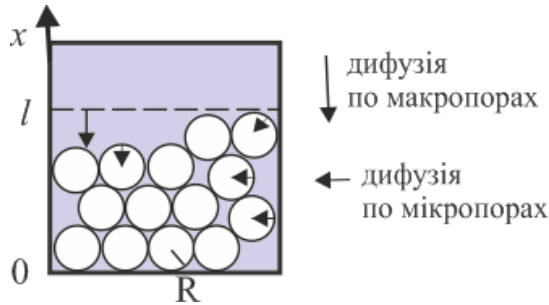


РИСУНОК. Схематичне представлення процесу дифузії

Дифузія речовини в сферичній складовій із центром у точці  $x \in \Omega$  пористого середовища описується рівнянням

$$\frac{\partial q}{\partial t} = d_2 \left( \frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial q}{\partial r} \right), \quad r \in (0, R), \quad t \in (0, T), \quad x \in \Omega. \quad (2)$$

Початкові умови:

$$c(x, 0) = \xi_1(x), \quad q(r, x, 0) = \xi_2(r, x), \quad x \in \Omega, \quad r \in (0, R). \quad (3)$$

Крайові умови для концентрації  $c(x, t)$ :

$$c(l, t) = c_\infty(t), \quad \left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x=0} = 0, \quad t \in (0, T). \quad (4)$$

Крайові умови в кожній точці  $(x, t) \in \Omega_T$  для концентрації  $q$ :

$$\left. \frac{\partial q(r, x, t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad q(R, x, t) = p c(x, t), \quad t \in (0, T), \quad p = \text{const} > 0. \quad (5)$$

**Наближений узагальнений розв'язок.** Різномасштабну математичну модель дифузії речовини в слабкій постановці побудовано в [8] і там же дано визначення наближеного узагальненого розв'язку. До розгляду введено лінійну множину  $M_{0n} \subset H_0$  функцій  $z_n = (v_n(x), w_n(r, x))$ , які мають вигляд

$$v_n(x) = \sum_{i=1}^{n_1} \beta_i^1 \varphi_i^1(x), \quad w_n(r, x) = \sum_{i=1}^{n_2} \beta_i^2(x) \varphi_i^2(r), \quad x \in [0, l], \quad r \in [0, R],$$

і задовольняють умови  $v_n(l) = 0$ ,  $w_n(R, x) = p v_n(x)$ ,  $x \in [0, l]$ , де  $\{\varphi_i^1(x)\}_{i=1}^{n_1}$ ,  $\{\varphi_i^2(r)\}_{i=1}^{n_2}$  – системи лінійно незалежних функцій, за допомогою яких утворюється підмножина  $M_{1n} \subset H$  функцій  $\bar{u}_n = (c_n(x, t), q_n(r, x, t))$ , кожна з яких може бути записана у вигляді

$$c_n(x, t) = \sum_{i=1}^{n_1} \alpha_i^1(t) \varphi_i^1(x) + \psi_1(x, t), \quad (x, t) \in [0, l] \times [0, T],$$

$$q_n(r, x, t) = \sum_{i=1}^{n_2} \alpha_i^2(x, t) \varphi_i^2(r), \quad r \in [0, R], \quad (x, t) \in [0, l] \times [0, T],$$

і функції  $\bar{u}_n$  задовольняють умови  $c_n(l, t) = c_\infty$ ,  $t \in [0, T]$ ,  $q_n(R, x, t) = p c(x, t)$ ,  $(x, t) \in \bar{\Omega}_T$ .

Наближений узагальнений розв'язок диференціальної задачі (1)–(5) визначено як функцію  $\bar{u}_n \in M_{1n} \subset H$ , яка  $\forall v_n \in M_{0n} \subset H_0$  задовольняє рівності

$$\int_0^l \varepsilon \frac{\partial c_n}{\partial t} v_n dx + \int_0^l \int_0^R r^2 \frac{\partial q_n}{\partial t} w_n dr dx + \int_0^l d_1 \varepsilon \frac{\partial c_n}{\partial x} \frac{\partial v_n}{\partial x} dx + \int_0^l \int_0^R r^2 d_2 \frac{\partial q_n}{\partial r} \frac{\partial w_n}{\partial r} dr dx - \int_0^l r^2 d_2 \left. \frac{\partial q_n}{\partial r} \right|_{r=R} w_n(R, x) dx + \frac{3(1-\varepsilon)}{R} d_2 \int_0^l \left. \frac{\partial q_n}{\partial r} \right|_{r=R} v_n(x) dx = 0, \quad t \in (0, T), \quad (6)$$

$$c_n(x, t=0) = 0, \quad q_n(r, x, t=0) = 0, \quad x \in [0, l], \quad r \in [0, R], \quad (7)$$

де

$$H = \{ \bar{u} = (c(x, t), q(r, x, t)) \in H_1 \times H_2 : c(l, t) = c_\infty, q(R, x, t) = p c(x, t), x \in (0, l), t \in (0, T) \},$$

$$H_1 = \left\{ v(x,t) : \int_0^T \int_0^l \left( v^2 + \left( \frac{\partial v}{\partial t} \right)^2 + \left( \frac{\partial v}{\partial x} \right)^2 \right) dxdt < \infty \right\},$$

$$H_2 = \left\{ q(r,x,t) : \int_0^T \int_0^l \int_0^R \left( q^2 + \left( \frac{\partial q}{\partial t} \right)^2 + \left( \frac{\partial q}{\partial r} \right)^2 \right) drdxdt < \infty \right\},$$

$$H_0 = \{ z = (v(x), w(r,x)) \in H_{10} \times H_{20} : w(R,x) = k v(x), x \in (0,l) \},$$

$$H_{10} = \{ v(x) \in W_2^1(0,l) : v(l) = 0 \}, \quad H_{20} = \left\{ w(r,x) : \int_0^l \int_0^R \left( w^2 + \left( \frac{\partial w}{\partial r} \right)^2 \right) drdx < \infty \right\}.$$

Враховуючи представлення функції  $\bar{u}_n$  з (6), (7) отримуємо задачу Коші для системи лінійних звичайних диференціальних рівнянь першого порядку:

$$M \frac{\partial \alpha^N}{\partial t} + K \alpha^N = F(t), \quad \forall t \in (0; T]; \tag{8}$$

$$M_0 \alpha^N(0) = F_0, \quad t = 0, \tag{9}$$

де  $\alpha^N(x,t) = (\alpha^1(t), \alpha^2(x,t))^T$ ,  $M = (m_{ij})_{i,j=0}^N$  – матриця мас,  $m_{ij} = \int_0^l \varepsilon \frac{\partial c_n}{\partial t} v_n dx + \int_0^l \int_0^R r^2 \frac{\partial q_n}{\partial t} w_n drdx$

$K = (k_{ij})_{i,j=0}^N$  – матриця жорсткості,  $k_{ij} = \int_0^l \int_0^R r^2 \frac{\partial q_n}{\partial t} w_n drdx + \int_0^l d_1 \varepsilon \frac{\partial c_n}{\partial x} \frac{\partial v_n}{\partial x} dx$ ,  $M_0 = (m_{ij}^0)_{i,j=0}^N$ ,

$F(t) = (f_i)_{i=0}^N$  – вектор правої частини,  $f_i = d_2 \int_0^l r^2 \frac{\partial q_n}{\partial r} \Big|_{r=R} w_n(R,x) dx - \frac{3(1-\varepsilon)}{R} d_2 \int_0^l \frac{\partial q_n}{\partial r} \Big|_{r=R} v_n(x) dx$ ,

$F_0 = (f_{i0})_{i=0}^N$ . Матриці  $M$ ,  $K$ ,  $M_0$  – симетричні, додатно-означені. У роботі [10] показано, що для отримання наближено-узагальненого розв'язку початково-крайової задачі (1)–(5) достатньо розв'язати задачу Коші (8), (9). Опишемо особливості побудови вказаних матриць для розв'язання задачі (1)–(5).

**Дискретизація розрахункової області.** Використаємо метод скінченних елементів (МСЕ) для знаходження наближеного узагальненого розв'язку. Проведемо дискретизацію області. Розіб'ємо відрізок  $[0, l]$  з кроком  $h_c$  на  $n_c = l/h_c$  елементарних відрізків  $[x_i, x_{i+1}]$ . Відрізок  $[0, R]$  розіб'ємо з кроком  $h_q$  на  $n_r = R/h_q$  елементарних відрізків  $[q_j, q_{j+1}]$ . При використанні кусково-квадратичних базисних функцій [12] для однозначного визначення поліному другого ступеня на елементарному відрізку  $[x_i, x_{i+1}]$  і забезпечення неперервності допустимої функції використовуються точки  $x_i, x_{i+1/2}, x_{i+1}$ ,  $x_{i+1/2} = (x_i + x_{i+1})/2$ , де  $i = \overline{0, n_c - 1}$ . Аналогічно для однозначного визначення поліному другого ступеня на елементарному відрізку  $[q_j, q_{j+1}]$  та забезпечення неперервності допустимої функції використовують вузлові точки  $q_j, q_{j+1/2}, q_{j+1}$ ,  $q_{j+1/2} = (q_j + q_{j+1})/2$ , де  $j = \overline{0, n_r - 1}$ .

Процедура розбиття відрізків формує 3 вектори:

- вектор  $C = (x_0, x_1, \dots, x_{N_c-1})$  розмірності  $N_c = 2n_c + 1$ , де елементарному відрізку  $\Delta_k$  відповідають вузли  $x_{2k}, x_{2k+1}, x_{2k+2}, k = 0, \dots, n_c - 1$ ;
- вектор  $Q = (q_0, q_1, \dots, q_{N_r-1})$  розмірності  $N_r = 2n_r + 1$ , де елементарному відрізку  $\Xi_k$  відповідають вузли  $q_{2k}, q_{2k+1}, q_{2k+2}, k = 0, \dots, n_r - 1$ ;
- вектор  $C\_Q$  розмірності  $N = (N_c \cdot (N_r + 1))$ , який містить точки векторів  $C$  та  $Q$ :  $C\_Q = (x_0, q_0, q_1, \dots, q_{N_r-1}, x_1, q_0, q_1, \dots, q_{N_r-1}, \dots, x_{N_c-1}, q_0, \dots, q_{N_r-1})$ , де вузлам елементарного відрізку  $\Delta_k$  відповідають елементи вектора  $C\_Q$  з номерами  $x_{2k\delta+\delta}, x_{2k\delta+\delta}, x_{2k\delta+2\delta}, k = 0, \dots, n_c - 1, \delta = N_r + 1$ ; а вузлам елементарного відрізку  $\Xi_k - x_{2k+j\delta+1}, x_{2k+j\delta+2}, x_{2k+j\delta+3}, k = 0, n_r - 1; \delta = N_r + 1, j = 0, N_c - 1$ .

Для наочності схематично покажемо як розміщені точки, де кожному  $x_i$  відповідає  $N_r$  елементів  $q_j^i, i = 0, N_c - 1, j = 0, N_r - 1$ . При комп'ютерній реалізації алгоритму розрахунки велися з використанням даних вектора  $C\_Q$ .

$x_0$	$x_1$	$x_2$	$x_3$	$\dots$	$x_{N_c-1}$
$q_0^0$	$q_0^1$	$q_0^2$	$q_0^3$	$\dots$	$q_0^{N_c-1}$
$q_1^0$	$q_1^1$	$q_1^2$	$q_1^3$	$\dots$	$q_1^{N_c-1}$
$q_2^0$	$q_2^1$	$q_2^2$	$q_2^3$	$\dots$	$q_2^{N_c-1}$
$q_3^0$	$q_3^1$	$q_3^2$	$q_3^3$	$\dots$	$q_3^{N_c-1}$
$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$
$q_{N_r-1}^0$	$q_{N_r-1}^1$	$q_{N_r-1}^2$	$q_{N_r-1}^3$	$\dots$	$q_{N_r-1}^{N_c-1}$

**Формування матриць мас та жорсткості.**

Матриця жорсткості  $M$  має розмірність  $N \times N$  і заповнена елементарними матрицями  $M^c$  розмірністю  $3 \times 3$ , що відповідають функції  $c(x, t)$ , та елементарними матрицями  $M^q$  розмірністю  $3 \times 3$ , що відповідають функції  $q(r, x, t)$ . Заповнення матриці  $M$  виконується таким чином.

1. У циклі для  $i=0$  поки  $i < N - move$ , де  $move = N_r + 1$ :

1.1) будується елементарна матриця  $M^c$  згідно алгоритму МСЕ для відрізка  $[x_i, x_{i+move}, x_{i+2*move}]$ , яка має

$$\text{вигляд } M^c = \begin{pmatrix} c_{00}^* & c_{01}^* & c_{02}^* \\ c_{10}^* & c_{11}^* & c_{12}^* \\ c_{20}^* & c_{21}^* & c_{22}^* \end{pmatrix};$$

1.2) до елементів матриці  $M$  на позиціях  $(k, j)$  додаються елементи матриці  $M^c$ , де  $k = i + 0*move, k = i + 1*move, k = i + 2*move, j = i + 0*move, j = i + 1*move, j = i + 2*move$ ;

1.3) збільшується індекс  $i = i + 2*move$ .

2. У циклі для  $i=1$  поки  $i < N$ , і додатковому внутрішньому циклі для  $ii=1$  до  $N_r - 1$ :

2.1) будується елементарна матриця  $M^q$  відповідно до алгоритму МСЕ;

2.2) до елементів матриці  $M$  додаються елементи матриці  $M^q$  на позиції, що відповідають номерам розбиття відрізка  $[0, R]$ , тобто, на позиції  $(k, j)$ , де  $k = i, k = i + 1, k = i + 2, j = i, j = i + 1, j = i + 2$ ;

2.3) збільшуються індекси  $i = i + 2, ii = ii + 2$ ;

2.4) якщо виконується умова  $ii \geq N_r$ , то  $i = i + 2$ ,  $ii = 1$ , тобто, якщо побудовано матрицю для всього відрізка  $[0, R]$ , що відповідає точці  $x_g$ ,  $g = \overline{0, N_c - 1}$ , то переходимо до побудови елементарної матриці для відрізка  $[0, R]$ , що відповідає точці  $x_{g+1}$  розбиття відрізка  $[0, l]$  (перехід до точки  $g = g + move$ ,  $g = \overline{0, N - move}$  у векторі  $C\_Q$ ).

Аналогічно до матриці  $M$  будується матриця жорсткості  $K$  яка має розмірність  $N \times N$  і заповнена елементарними матрицями  $K^c$  розмірності  $3 \times 3$ , що відповідають функції  $c(x, t)$ , та елементарними матрицями  $K^q$  розмірності  $3 \times 3$ , що відповідають функції  $q(r, x, t)$ . Алгоритм заповнення матриці  $K$  аналогічний до алгоритму заповнення матриці  $M$ .

Слід відмітити, що можливе розв'язання задачі окремо для рівняння (1) при заповненні матриці  $K$  лише елементами  $K^c$  та матриці  $M$  лише елементами  $M^c$ , а також окремо для рівняння (2), тобто при заповненні матриці  $K$  лише елементами  $K^q$  та матриці  $M$  лише елементами  $M^q$ . Приклад заповненої матриці  $K$ .

$$K = \begin{pmatrix} c_{00}^{[0]} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{06}^{[0]} & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & q_{11}^{[0](0)} & q_{12}^{[0](0)} & q_{13}^{[0](0)} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & q_{21}^{[0](0)} & q_{22}^{[0](0)} & q_{23}^{[0](0)} & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & q_{31}^{[0](0)} & q_{32}^{[0](0)} & q_{33}^{[0](0)} + q_{33}^{[0](1)} & q_{34}^{[0](1)} & q_{35}^{[0](1)} & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & q_{43}^{[0](1)} & q_{44}^{[0](1)} & q_{45}^{[0](1)} & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & q_{53}^{[0](1)} & q_{54}^{[0](1)} & q_{55}^{[0](1)} & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ c_{60}^{[0]} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66}^{[0]} & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & q_{77}^{[1](0)} & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & q_{87}^{[1](0)} & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & q_{97}^{[1](0)} & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ c_{120}^{[0]} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{126}^{[0]} & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & c_{N-2(N_r-1)N-N_r-1}^{[n-1]} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & c_{N-N_r-1N-N_r-1}^{[n-1]} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & q_{N-5N-5}^{[N-1](n_r-2)} & q_{N-5N-4}^{[N-1](n_r-2)} & q_{N-5N-3}^{[N-1](n_r-2)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & q_{N-4N-5}^{[N-1](n_r-2)} & q_{N-4N-4}^{[N-1](n_r-2)} & q_{N-4N-3}^{[N-1](n_r-2)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & q_{N-3N-5}^{[N-1](n_r-2)} & q_{N-3N-4}^{[N-1](n_r-2)} & q_{N-3N-3}^{[N-1](n_r-2)} + q_{N-3N-3}^{[N-1](n_r-1)} & q_{N-3N-2}^{[N-1](n_r-1)} & q_{N-3N-1}^{[N-1](n_r-1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & q_{N-2N-3}^{[N-1](n_r-1)} & q_{N-2N-2}^{[N-1](n_r-1)} & q_{N-2N-1}^{[N-1](n_r-1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & q_{N-1N-3}^{[N-1](n_r-1)} & q_{N-1N-2}^{[N-1](n_r-1)} & q_{N-1N-1}^{[N-1](n_r-1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & q_{N-1N-3}^{[N-1](n_r-1)} & q_{N-1N-2}^{[N-1](n_r-1)} & q_{N-1N-1}^{[N-1](n_r-1)} & 0 \end{pmatrix}$$

**Формування вектора навантажень.** Вектор правих частин  $F$  розмірності  $N$  формується із елементарних векторів:  $F^c$  розмірності  $N_c$  та  $F^q$  розмірності  $N_q$ .

Заповнення вектора  $F$  здійснюється за наступним алгоритмом.

1. У циклі для елементів  $i = 0$  поки  $i < N - move$ , де  $move = N_r + 1$ :

1.1) будується елементарний вектор  $F^c$  згідно алгоритму МСЕ для відрізка  $[x_i, x_{i+move}, x_{i+2*move}]$ ;

1.2) додаються елементи вектора  $F^c$  до елементів глобального вектора  $F$  на позиції  $k = i + 0 \cdot \text{move}$ ,  $k = i + 1 \cdot \text{move}$ ,  $k = i + 2 \cdot \text{move}$  ;

1.3) збільшується індекс  $i = i + 2 \cdot \text{move}$  .

2. У циклі для елементів від  $i = 1$  до  $N - 1$  і додатковому внутрішньому циклі для  $ii = 1$  до  $N_r - 1$  :

2.1) будується елементарний вектор  $F^q$  згідно алгоритму МСЕ;

2.2) додаються елементи вектора  $F^q$  до елементів вектора  $F$  на позиції  $k = i$ ,  $k = i + 1$ ,  $k = i + 2$  ;

2.3) збільшується індекс  $i = i + 2$  ,  $ii = ii + 2$  ;

2.4) якщо виконується умова  $ii \geq N_r$  , то  $i = i + 2$  ,  $ii = 1$  , тобто якщо побудовано вектор для всього відрізка  $[0, R]$  , що відповідає, наприклад, точці  $x_j$  , то переходимо до побудови  $F^q$  для відрізка  $[0, R]$  , що відповідає точці  $x_{j+1}$  ,  $j = \overline{0, N_c - 1}$  (перехід до точки  $j = j + \text{move}$  ,  $j = \overline{0, N - \text{move}}$  у векторі  $C\_Q$ ).

**Врахування крайових умов.** Умови II роду  $\left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x=0} = a_1$  та  $\left. \frac{\partial q}{\partial r} \right|_{r=0} = a_2$  враховуються шляхом додавання значень  $a_1$  та  $a_2$  у позиції вектора правої частини  $F(t)$  , що відповідають точкам  $x_0$  та  $q_0^i$  ,  $i = 1, \dots, j \cdot (N_r + 1) + 1$  ,  $j = \overline{1, N_c - 1}$  .

Нехай відомо, що умову I роду  $c(x=l, t) = c_\infty, t \in (0, T)$  задано у точці  $x_{N-N_r} = l$  . Врахування умови можливе двома способами.

**Спосіб 1.** Прямим включенням значень у систему. Тоді елементи  $k_{N-N_r, j} = 0$  ,  $m_{N-N_r, j} = 0$  ,  $k_{j, N-N_r} = 0$  ,  $m_{j, N-N_r} = 0$  ,  $j = \overline{0, N-1}$  ,  $j \neq N - N_r$  , а діагональний елемент  $k_{N-N_r, N-N_r} = 1$  .

Права частина:  $f_j = f_j - k_{j, N-N_r} \cdot c_\infty - m_{j, N-N_r} \cdot \frac{\partial c_\infty}{\partial t}$  ,  $j = \overline{0, N-1}$  ,  $j \neq N - N_r$  .

**Спосіб 2.** Полягає у розміщенні достатньо великого числа (наприклад,  $V = 10^{12}$ ) на місці діагонального елемента  $k_{N-N_r, N-N_r} = V$  та домноженні на нього відповідного елемента вектора правих частин  $f_{N-N_r} = c_\infty \cdot V$  .

Для кожної точки  $x_i$  ,  $i = i + \text{move}$  ,  $i = \overline{1, N_c - 1}$  ,  $\text{move} = N_r + 1$  , врахування умови I роду  $q(r = R, x, t) = pc(x, t)$  ,  $t \in (0, T)$  ,  $x \in [0, l]$  виконується наступним чином:

у циклі, поки  $i < N$  :

$i = 0$  ,  $j = N_r$  ;

поки  $(i < N)$  {

$g = k_{ii}$  ;  $k_{jj} q_j = g \cdot V$  ;

$k_{ji} q_j = -g \cdot p \cdot V$  ;

$i = i + N_r + 1$  ;  $j = j + N_r + 1$  ;

}

**Дискретизація за часом та схема Кранка – Ніколсона.** Для чисельного розв'язання задачі (8), (9) при  $t \geq 0$  використовується схема Кранка – Ніколсона [10].

Розіб'ємо часовий проміжок  $[0, T]$  на  $N_T$  рівних частин з кроком  $\tau = T/N_T$ . Нехай  $t_m = \tau m$ . Тоді на  $m$ -ому часовому шарі маємо

$$\frac{1}{\tau} M (\alpha_{m+1} - \alpha_m) + \frac{1}{2} K (\alpha_{m+1} + \alpha_m) = \frac{1}{2} (F_{m+1} + F_m), \quad m = \overline{0, N_T}, \quad (10)$$

$$\alpha^N(0) = M_0^{-1} F_0, \quad (11)$$

$\alpha_m$  – наближений розв'язок задачі Коші (8), (9).

В результаті застосування схеми (10), (11) отримуємо СЛАР

$$Ay = B,$$

де  $A = \left( M + \frac{\tau}{2} K \right)$ ,  $B = \left( M - \frac{\tau}{2} K \right) \alpha_m + \frac{\tau}{2} (F_{m+1} + F_m)$ ,  $m = \overline{0, N_T}$ , яка розв'язується за допомогою компактною схеми Гаусса (методом Краута) [11].

**Модельний приклад.** Задачу (1) – (5) розв'язано при таких значеннях параметрів: товщина пластини  $L = 6$  см, час  $T = 10$  с,  $\Omega = (0, 6)$ ,  $\Omega_T = \Omega \times (0, 10)$ ; пористі складові мають радіус  $R = 0.02$  см; пористість  $\varepsilon = 0.8$ ; коефіцієнти дифузії:  $d_1 = 0.5625$  см<sup>2</sup>/с,  $d_2 = 0.083333$  см<sup>2</sup>/с. Крайові умови  $c(6, t) = 72.0016 + 2t$ ,  $\left. \frac{\partial c}{\partial x} \right|_{x=0} = 0$ ,  $\left. \frac{\partial q(r, x, t)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0$ ,  $q(0.02, x, t) = 0.5c(x, t)$  при  $x \in \Omega$ ,  $r \in (0, R)$ ,  $t \in (0, 10)$ . Початкові умови:  $c(x, 0) = 2x^2 + 0.0016$ ,  $q(r, x, 0) = x^2 + 2r^2$ ,  $x \in \Omega$ ,  $r \in (0, R)$ . Розрахунки проведені для  $h_c = 0.2$ ,  $h_q = 0.001$ . Часовий відрізок розбивався із кроком  $h_t = 0.1$ . При цьому  $n_c = 30$ ,  $n_q = 20$ ,  $N_c = 61$ ,  $N_q = 41$ ,  $N = 2562$ ,  $N_T = 10$ . Точний розв'язок такої задачі має вигляд  $c(x, t) = 2x^2 + 2t + 0.0016$ ,  $q(r, x, t) = x^2 + 2r^2 + t$ .

При чисельному розв'язанні модельного прикладу відносна похибка  $\delta = |(u_T - u_H) / u_T| \cdot 100\%$ ,  $u_T \neq 0$  не перевищувала  $1.048 \cdot 10^{-5} \%$  ( $u_T$  – класичний розв'язок задачі (1) – (5),  $u_H$  – її наближений розв'язок).

**Висновки.** В роботі описано алгоритми чисельного розв'язання задачі неусталеної дифузії моноречовини в нанопоровому середовищі, постановка якої наведена у [2, 8]. Описано особливості дискретизації області, побудови матриці мас, жорсткості та вектора навантажень при розв'язанні задачі за допомогою МСЕ. Ефективність розроблених алгоритмів підтверджується результатами розв'язання модельного прикладу.

#### Список літератури

1. Kärger J., Ruthven D. Diffusion and adsorption in porous solids. *Handbook of porous solids* Ed. by F. Schuth, K. W. Sing, J. Weitcamp. Weinheim: Wiley-VCH, 2002. P. 2089–2173. <https://doi.org/10.1002/9783527618286.ch28>
2. N'gokoli-Kekele P. An analytical study of molecular transport in a zeolite crystallite bed. N'gokoli-Kekele P., Springuel-Huet, M.-A., Fraissard J. *Adsorption*. 2002. 8 (3). P. 35–44. <https://doi.org/10.1023/A:1015266423017>
3. Ruthven D. Principles of adsorption and adsorption processes. New York: Wiley-Interscience, 1984. 464 p.
4. Kärger J., Grinberg F., Heitjans P. Diffusion fundamentals. Leipzig: Leipziger Universitätsverlag, 2005. 615 p.
5. Petryk M., Leclerc S., Canet D., Fraissard J. Mathematical modeling and visualization of gas transport in a zeolite bed using a slice selection procedure. *Diffusion Fundamentals*. 2007. 4. P. 11.1–11.23.
6. Сергієнко І.В., Петрик М.Р., Хіміч О.М., Кане Д. та ін. Математичне моделювання масопереносу в середовищах частинок нанопористої структури. Київ: НАНУ, Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова, 2014. 210 с. <http://elartu.tntu.edu.ua/handle/123456789/17812>

7. Дейнека В.С., Петрик М.Р., Кане Д., Фрессард Ж. Математичне моделювання та ідентифікація параметрів масопереносу в неоднорідних і нанопористих середовищах (адсорбція, компетитивна дифузія). Київ: НАНУ, 2014. 177 с. <http://elartu.tntu.edu.ua/bitstream/123456789/17811>
8. Сергиенко И.В., Дейнека В.С. Идентификация градиентными методами параметров задач диффузии вещества в нанопористой среде. *Проблемы управления и информатики*. 2010. № 6. С. 5–18. <https://doi.org/10.1615/JAutomatInfScien.v42.i11.10>
9. Дейнека В.С. Идентификация параметров задач массопереноса в нанопористых средах при известных суммарных распределениях массы. *Доповіди НАНУ*. 2013. № 4. С. 26–32. <http://dspace.nbuv.gov.ua/handle/123456789/85633>
10. Дейнека В.С., Сергиенко И.В., Скопецкий В.В. Модели и методы решения задач с условиями сопряжения. Киев: Наукова думка, 1998. 615 с.
11. Программное обеспечение ЭВМ МИР-1 и МИР-2 (под редакцией И.Н. Молчанова). Киев: Наукова думка, 1976. 280 с.

Одержано 11.06.2020

**Варенюк Наталія Анатоліївна,**

кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник  
Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України, Київ,  
[nvareniuk@ukr.net](mailto:nvareniuk@ukr.net)

**Тукалевська Нелля Іванівна,**

кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник  
Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України, Київ.

УДК 519.6

Н.А. Варенюк<sup>1</sup>, Н.И. Тукалевская<sup>1\*</sup>**Алгоритмы численного решения задачи диффузии вещества в нанопористой среде**<sup>1</sup> Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України, Київ\* Переписка: [nvareniuk@ukr.net](mailto:nvareniuk@ukr.net)

**Введение.** Математическое моделирование массопереноса в неоднородных средах микропористой структуры и построение решений соответствующих задач массопереноса рассматривались разными авторами [1–9 и др.]. В работах [6, 7] предложена методология моделирования систем массопереноса и идентификации параметров в средах частиц нанопористой структуры (диффузия, адсорбция, компетитивная диффузия газов, фильтрационная консолидация), которые описываются неклассическими краевыми и начально-краевыми задачами с учетом взаимовлияния потоков микро- и макропереноса, разнородности, структуры микропористых частиц, многокомпонентности и других факторов. В работах [8, 9] для математической модели неустановившейся диффузии моновещества в нанопористой среде, которая описана в [2] в виде разномасштабной дифференциальной математической задачи, получены классические задачи в слабой постановке. В данной работе для указанной выше математической задачи построены алгоритмы численного решения с использованием метода конечных элементов. Приведены результаты численного решения тестовой задачи, которые подтверждают эффективность разработанных алгоритмов.

**Цель работы.** Для задачи неустановившейся диффузии моновещества в нанопористой среде построить алгоритмы дискретизации с помощью метода конечных элементов (МКЭ) с использованием квадратичных базисных функций. Эффективность разработанных алгоритмов подтвердить решением задачи с известным решением.

**Результаты.** Предложены алгоритмы численного решения задачи неустановившейся диффузии моновещества в нанопористой среде. Описаны особенности дискретизации области, построения матриц масс, жёсткости, векторов нагрузки и формирования из них соответствующих систем МКЭ. Показать эффективность разработанных алгоритмов.



**Ключевые слова:** математическое моделирование, численные методы, неустановившаяся диффузия моновещества, нанопористая среда, метод конечных элементов (МКЭ).

UDC 519.6

N.A. Vareniuk <sup>1</sup>, N.I. Tukalevska <sup>1\*</sup>

## Algorithms for Numerical Solution to the Problem of Diffusion in Nanoporous Media

<sup>1</sup> V.M. Glushkov Institute of Cybernetics of the NAS of Ukraine, Kyiv

\* Correspondence: [nvareniuk@ukr.net](mailto:nvareniuk@ukr.net)

**Introduction.** Mathematical modeling of mass transfer in heterogeneous media of microporous structure and construction of solutions to the corresponding problems of mass transfer was considered by many authors [1–9, etc.]. In [6, 7] authors proposed a methodology for modeling mass transfer systems and parameter identification in nanoporous particle media (diffusion, adsorption, competitive diffusion of gases, filtration consolidation), which are described by non-classical boundary and initial-boundary value problems taking into account the mutual influence of micro- and macro-transfer flows, heteroporosity, the structure of microporous particles, multicomponent and other factors. In [8, 9] for a mathematical model of nonstationary diffusion of a single substance in a nanoporous medium described in [2] in the form of a multi-scale differential mathematical problem, the classical problems in the weak formulation were obtained. In this paper, algorithms for solving the above mathematical problems are constructed by using the finite element method. The results of the numerical solution of the test problem are presented. The results confirm the efficiency of the developed algorithms.

**The purpose** is to solve a problem of nonstationary diffusion of single substance in nanoporous medium by constructing discretization algorithms using FEM quadratic basis functions.

**Results.** Algorithms for the numerical solution of the problem of nonstationary diffusion of single substance in a nanoporous medium are proposed. Peculiarities of discretization of the region and construction of the matrix of masses, stiffness, and vector of right-hand sides when solving the problem by using FEM are described. The efficiency of the developed algorithms is confirmed by the results of solving a model example.

**Keywords:** mathematical modeling, numerical methods, nonstationary diffusion, nanoporous medium, finite element method.